



TITLE:

S-D交換相互作用の摂動論

AUTHOR(S):

福島, 謙二

CITATION:

福島, 謙二. S-D交換相互作用の摂動論. 物性研究 1968, 11(1): 14-23

ISSUE DATE:

1968-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/86779>

RIGHT:

S-D 交換相互作用の摂動論

都立大理 福島 謙 二

(9月4日受理)

§ 1.

S-D 相互作用の摂動論的取扱いは、Abrikosov¹⁾ 流と Doniach²⁾ 流とがある。このノートの目的は Doniach 流を、高次の項まで系統的に計算出来るような形に整備することである。most divergent diagram を選び出し、その寄与を計算する。

結果は 5 次まで Abrikosov の結果と一致する。

§ 2.

温度グリーン関数

$$G_{pp'}(\tau-\tau') = -\langle T A_{p\mu}(\tau) A_{p'\mu}^+(\tau') \rangle \quad (1)$$

の摂動展開を考える。演算子は電導電子に関するものでハイゼンベルグ表示である。相互作用表示に移ると

$$G_{pp'}(\tau-\tau') = -\langle T U(\beta) a_{p\mu}(\tau) a_{p'\mu}^+(\tau') \rangle / \langle U(\beta) \rangle \quad (2)$$

$$U(\beta) \equiv e^{\beta H_0} e^{-\beta H} = T \exp \left(-\int_0^\beta d\tau V(\tau) \right) \quad (3)$$

ここで演算子はすべて相互作用表示である。今相互作用 $V(\tau)$ が non-magnetic ならば、(2) 式の展開は Wick の定理を使って容易に整理される。

V が S-D 交換相互作用

$$V = -\frac{J}{N} \sum_{kk', \lambda\lambda'} (\sigma_{\lambda\lambda'} \cdot S) a_{k\lambda}^+ a_{k'\lambda'} \quad (4)$$

の時には、スピン演算子 S の T 積が入って来るため特別の工夫が必要である。

グリーン関数の n 次の展開は、

$$G_{pp'}^{(n)} = \left(-\frac{J}{N}\right)^n \sum_{p_i j_i} \int \prod d\tau_i G_p^{(0)}(\tau - \tau_1) G_{p_1}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2) \dots$$

$$G_p^{(0)}(\tau_n - \tau') (\sigma^{j_1} \sigma^{j_2} \dots \sigma^{j_n})_{\mu\mu} < T S^{j_1}(\tau_1) \dots S^{j_n}(\tau_n) >_S \quad (5)$$

のようにかける。但し、(5)式は電子線の closed loop を含まない展開項に対応している。closed loop を含む場合への一般化は可能であるが、ここでは必要がないので省略する。(5)式で

$$< T S(\tau) \dots >_S = \frac{1}{2S+1} \text{Tr} T S(\tau) \dots \quad (6)$$

である。

次に、Doniach にしたがってスピン演算子の N 積を定義し、T 積を N 積に書き直すことを考えよう。スピン演算子の積が (5) 式の Pauli スピンの積と同じ順序に並んでいるとき、この積を N 積と名付ける。

$$: S^{j_1}(\tau_1) S^{j_2}(\tau_2) \dots S^{j_n}(\tau_n) : = S^{j_1} S^{j_2} \dots S^{j_n} \quad (7)$$

一般に、T 積は、交換関係 (縮約) を含む N 積の和に書き直される。2 スピンの場合

$$T S^j(\tau) S^{j'}(\tau') = : S^j S^{j'} : + c \{ S^j(\tau) S^{j'}(\tau') \} \quad (8)$$

$$c \{ S^j(\tau) S^{j'}(\tau') \} = -\theta(\tau' - \tau) [S^j, S^{j'}] = -i\theta(\tau' - \tau) \epsilon_{jj'k} S^k \quad (9)$$

(if $: S^j S^{j'} : = S^j S^{j'}$)
ここで、 ϵ_{ijk} は i, j, k が cyclic のとき +1 で、anti-cyclic のとき -1 のテンソルである。

(9) 式からわかるように、縮約 $c \{ S, S \}$ は再び演算子であり、したがって 3 ケ以上のスピンの場合には、縮約が T 積、N 積の中で占める位置を指定することが必要である。

$: S^j(\tau) S^{j'}(\tau') : = S^j S^{j'}$ のとき、縮約 $c \{ S^j(\tau) S^{j'}(\tau') \}$ の位置

(時間と normal position) を $s^{j'}(\tau')$ のそれと一致させる。このように
 約束すると 3 スピンの場合は、

$$\begin{aligned} T s^1(\tau_1) s^2(\tau_2) s^3(\tau_3) &= s^1 s^2 s^3 + s^1 c\{s^2, s^3\} \\ &+ s^2 c\{s^1, s^3\} + c\{s^1, s^2\} s^3 + c\{s^2, c\{s^1, s^2\}\} \\ &+ c\{c\{s^1, s^2\}, s^3\} \end{aligned} \quad (10)$$

$$(\text{if } :s^1 s^2 s^3: = s^1 s^2 s^3)$$

(10) 式を導くさい、 s^1, s^2, s^3 の順序で normal position に移した。

そうすると $c\{s^1, c\{s^2, s^3\}\}$ の項は現われない。即ち番号の若いものから
 先に縮約することになる。任意箇数のスピンに対して (10) 式に相当するも
 のを書くことは可能であるが、より直観的な diagram の方法を使うことに
 しよう。縮約に点線を対応させると、グリーン関数の 3 次の展開は (10) 式
 の順序で図 1 のようになる。

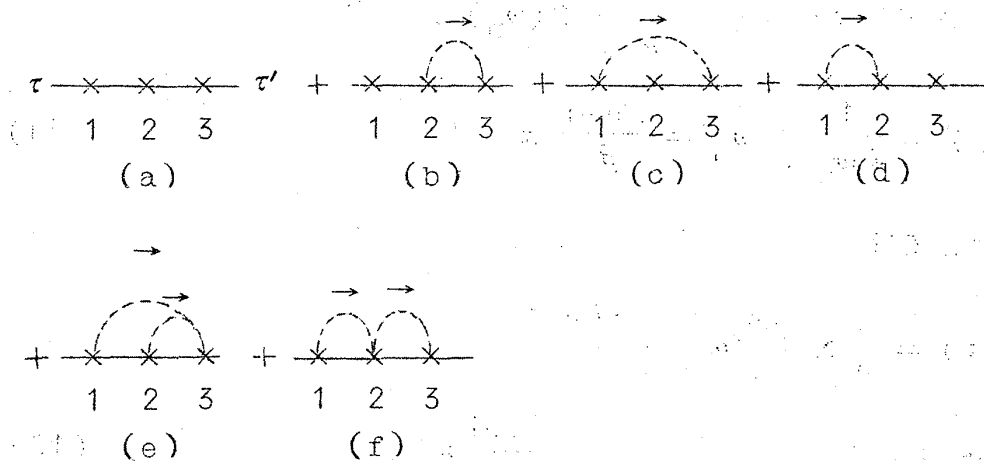


図 1

ここで図 2 の diagram は縮約に normal position を指定する約束によ
 って除かれる。

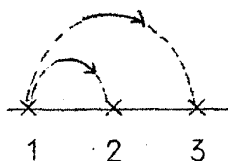


図 2

法則化すると，1つの Vertex から2本以上の点線が出ることはない，と云うことになる。高次の diagram は，上の制限の範囲内で，Vertex を可能な仕方で点線で橋わたしすることによって得られる。Vertex 1, 2 を結ぶ点線には Spin propagator $D(\tau_1 - \tau_2) \equiv \theta(\tau_2 - \tau_1)$ を対応させ，同時にスピノ演算子 $s^1 s^2$ を縮約 ($-[s^1, s^2]$) することになる。(図1(e)には $[s^2, [s^1, s^3]]$ を)。

§ 3.

この節では，前節で与えられた diagram の表式をフーリエ変換する。

Spin propagator のフーリエ変換は，

$$D(\tau) \equiv \theta(-\tau) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_n D(\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}$$

$$D(\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n}, \quad \omega_n = \frac{2n+1}{\beta} \pi \quad (11)$$

電導電子に対しては，

$$G_p^{(0)}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n G_p^{(0)}(\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}$$

$$G_p^{(0)}(\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_p}, \quad \omega_n = \frac{2n+1}{\beta} \pi \quad (12)$$

である。

実は diagram の表式のフーリエ変換は大変面倒である。先づ第一に，奇数箇の propagator が出入りする Vertex では振動数の総和が奇数になるので，振動数が各 Vertex で保存しなくなる。このことから個々の diagram は $\tau - \tau'$ の関数にならない部分を含む。然しもともとのグリーン関数は $\tau - \tau'$ の関数であり，この事情は展開の各次数でなり立っているはずである。

実際、三次の展開について考えて見るとゼロでない寄与をするのは、図 2

(a) (b) (c) (d) ((e) (f) は $T_r(\sigma \cdot S)$ を含むのでゼロ) であるが、
 $\tau - \tau'$ の関数にならない部分は (b) + (c) + (d) で互に相殺する。

第二に、 $\tau - \tau'$ の関数になる部分もなお意味のはっきりしない項を含むが、
 再び (b) + (c) + (d) をとるとそれらは互に相殺し、簡単な意味のはっきりした項だけが残る。

結局 (b) (c) (d) に対応して次の表式を得る。

(Appendix 参照)。

$$G_{pp'}^{(3b)}(\omega_n) = G_{pp'}^{(3d)}(\omega_n) = \frac{1}{4} S(S+1) G_p^{(0)}(\omega_n) G_{p'}^{(0)}(\omega_n) \times \\ \times \left(-\frac{J}{N}\right)^3 \sum_{p_1 p_2} G_{p_1}^{(0)}(\omega_n) \mathcal{F}_{\omega_n} G_{p_2}^{(0)}(\omega_n) \quad (13)$$

$$G_{pp'}^{(3c)}(\omega_n) = -\frac{1}{4} S(S+1) G_p^{(0)}(\omega_n) G_{p'}^{(0)}(\omega_n) \times \\ \times \left(-\frac{J}{N}\right)^3 \sum_{p_1 p_2} \mathcal{F}_{\omega_n} G_{p_1}^{(0)}(\omega_n) G_{p_2}^{(0)}(\omega_n)$$

ここで互に相殺する項は除いた。 $\pm \frac{1}{4} S(S+1)$ 因子はスピン積の統計平均から出る。

$$\mathcal{F}_{\omega_n} G_p^{(0)} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{f(x)}{i\omega_n - x} \{ G_p^{(0)}(x+i\delta) - G_p^{(0)}(x-i\delta) \}, \text{ etc} \quad (14)$$

(14) 式の意味であるが、(14) 式は

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1 \neq \omega_n} \frac{1}{i\omega_n - i\omega_1} G_p^{(0)}(\omega_1)$$

に対応している。したがって diagram から直接 (13) 式を出すためには、
 各 Vertex で振動数が保存するように考え、Spin propagator に
 $(i\omega_n - i\omega_1)^{-1}$ 等を対応させ (図 3)，振動数についての和をよく知られた方法で積分に変えればよい。

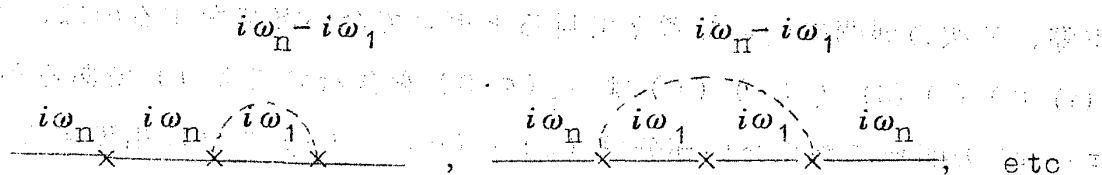


図 3

われわれは上述のような diagram と表式の簡単な対応を 4 次まで確めたが、おそらく一般的に成り立つものと思われる。

§ 4.

この節では most divergent self energy part の構造とその和を求めぬ。一体グリーン関数の self energy part を Σ とすると

$$\begin{aligned} G_{pp'} &= \delta_{pp'} G_p^{(0)} + G_p^{(0)} G_{p'}^{(0)} \frac{1}{N} \langle \Sigma + \Sigma F \Sigma + \dots \rangle_S \\ &= \delta_{pp'} G_p^{(0)} + G_p^{(0)} G_{p'}^{(0)} \frac{1}{N} \langle \Sigma \frac{1}{1-F\Sigma} \rangle_S \end{aligned} \quad (15)$$

ここで

$$F = \frac{1}{N} \sum_p G_p^{(0)}$$

Σ はスカラーであるから次のようにかける。

$$\Sigma = \Sigma^0 + (\sigma \cdot S) \Sigma^1 \quad (16)$$

Σ の展開 (三次まで) は

$$\Sigma = x + \text{(a)} + \text{(b)} + \text{(c)} + \text{(d)} + \dots \quad (17)$$

ここで $x = -J(\sigma \cdot S)$ である。(17) 式の (a) (c) (d) は $J \left(\frac{J}{D} \ln \frac{\omega}{D} \right)^n$ の寄与を与え、most divergent である。例えば

$$\begin{aligned} \Sigma^{(d)}(\omega) &\propto (-J)^3 \mathcal{F}_\omega [F \mathcal{F} F] = -J (J\rho)^2 \times \\ &\times \left[\frac{1}{2} \left(\int_{-D}^D dx \frac{f(x)}{\omega-x} \right)^2 + \int_{-D}^D dx \frac{f(x)^2}{\omega-x} \ln \frac{D+x}{D-x} \right] \end{aligned} \quad (18)$$

他方, (b) は

$$\Sigma^{(b)}(\omega) \propto (-J)^3 \mathcal{F}_\omega F^2 = -2J (J\rho)^2 \times \int_{-D}^D dx \frac{f(x)}{\omega-x} \ln \frac{D+x}{D-x} \quad (19)$$

で, $J \left(\frac{J}{D} \right)^2$ 程度の量であるから (18) 式第 1 項に比して無視出来る
 $\left(\frac{J}{D} \ll 1, \frac{J}{D} \ln \frac{\omega}{D} = 0 \left(\frac{J}{D} \right)^0 \right)$ 。したがって most divergent self energy part は bare Vertex \mathbf{X} と同様 J order の寄与を与える。
 (18), (19) 式の計算からわかるように, 与えられた次数では演算 \mathcal{F}_ω の最大数 (Spin propagator の数の最大数) を含む, diagram が most divergent である。4 次の most divergent diagram を図 4 で示す。

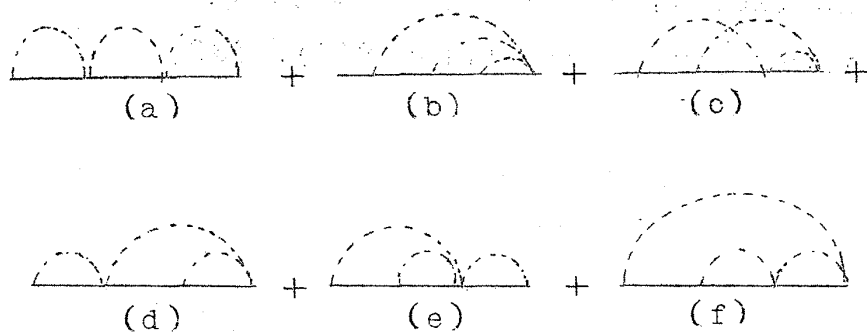


図 4

図 4 (d) (e) (f) と (17) 式 (d) はスピンの統計平均とすると点は 0 となる。われわれは, most divergent diagram の和を積分方程式の形で求めることが出来なかった。5 次までの計算では

$$\Sigma^{\sigma}(\omega) = -J [1 + G(\omega) + G(\omega)^2 + G(\omega)^3 + G(\omega)^4 + \dots] \quad (20)$$

福島謙二

ここで $G(\omega) = -J \rho \int_{-D}^D dx \frac{f(x)}{\omega - x}$

を得た。 $\Sigma^0(\omega)$ はゼロになる。(20) 式から

$$\Sigma(\omega) = -J(1 - G(\omega))^{-1}(\sigma \cdot S) \quad (21)$$

を予想すると, (15) 式の因子は J の lowest order で

$$\begin{aligned} \langle \Sigma \frac{1}{1 - F \Sigma} \rangle_S &\doteq F \langle \Sigma^2 \rangle \\ &= -S(S+1) F J^2 (1 - G(\omega))^{-2} \end{aligned} \quad (22)$$

になる。ここで $\langle (\sigma \cdot S) \rangle_S = 0$ を用いた。

(22) 式の結果は Abrikosov の結果と一致する。

註

(1) A. A. Abrikosov, Physics 2 (1965), 5.

(2) S. Doniach, Phys. Rev. 144 (1966), 382.

§ Appendix

(11) 式を使うと,

$$G^{(3b)} = \frac{1}{4} S(S+1) G_n^{(0)} G_{n'}^{(0)} \left[\frac{1}{2} \delta_{n,n'} G_n^{(0)} G_n^{(0)} - \right. \\ \left. - \frac{4}{\beta^3} \sum_{\ell,1} \frac{1}{i\omega_\ell} \frac{1}{i\omega_\ell - i\omega_n + i\omega_1} \frac{1}{i\omega_\ell - i\omega_{n'} + i\omega_1} G_1^{(0)} G_{n'}^{(0)} \right] \quad (A1)$$

ここで運動量の添字は落した。添字 n は ω_n の略である。 $G^{(3d)}$ は (A1) で n, n' を入れ替えたものに等しい。

$$G^{(3c)} = -\frac{1}{4} S(S+1) G_n^{(0)} G_{n'}^{(0)} \left[\frac{1}{2} \delta_{n,n'} G_n^{(0)} G_n^{(0)} - \right. \\ \left. - \frac{4}{\beta^3} \sum_{\ell,1} \frac{1}{i\omega_\ell} \frac{1}{i\omega_\ell - i\omega_n + i\omega_1} \frac{1}{i\omega_\ell - i\omega_{n'} + i\omega_1} G_1^{(0)} G_1^{(0)} \right] \quad (A2)$$

ℓ についての和を行うと

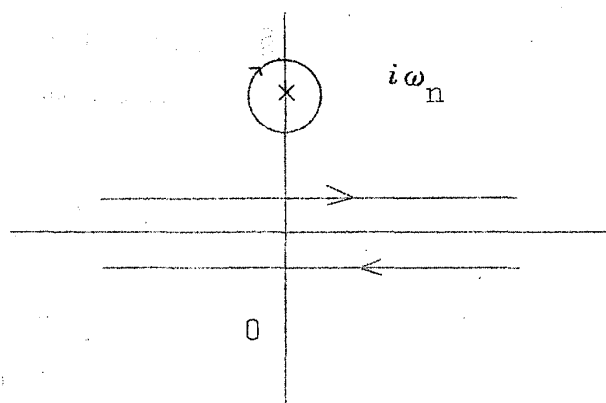
$$\frac{1}{\beta^2} \sum_{\ell} \frac{1}{i\omega_\ell} \frac{1}{i\omega_\ell - i\omega_n + i\omega_1} \frac{1}{i\omega_\ell - i\omega_{n'} + i\omega_1} \\ = -\frac{1}{4} \delta_{n,n'} (1 - \delta_{n,1}) \frac{1}{i\omega_n - i\omega_1} \\ - \frac{1}{4} (1 - \delta_{n,n'}) \frac{1}{i\omega_n - i\omega_{n'}} (\delta_{n,1} - \delta_{n',1}) \quad (A3)$$

最後の項 ($n \neq n'$) は (b) + (c) + (d) で相殺する。第 1 項 ($n = n$) を (A1) に代入すると,

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n \neq 1} \frac{1}{i\omega_n - i\omega_1} G_1^{(0)} = \frac{i}{2\pi} \oint dz \frac{f(z)}{i\omega_n - z} G^{(0)}(z) \quad (A4)$$

積分路は図 A.1 に示されている。

図 A 1



$$(A4) = \frac{1}{\beta} (G^{(0)'}(i\omega_n) - \frac{\beta}{2} G^{(0)}(i\omega_n)) + \mathcal{F}_{\omega_n} G^{(0)} \quad (A5)$$

(A5) の第 1 項は再び (b) + (c) + (d) で相殺する。